

晶体相场法模拟小角度晶界的位错结构及其演化*

Simulating Structure of Dislocation and Its Evolution in Low Angle Grain Boundary by Phase Field Crystal Method

卢成健^{1,3}, 蒋丽婷¹, 王玉玲¹, 罗志荣^{1,3}, 黄创高^{1,2}, 高英俊^{1,2**}

LU Cheng-jian^{1,3}, JIANG Li-ting¹, WANG Yu-ling¹, LUO Zhi-rong^{1,3}, HUANG Chuang-gao^{1,2}, GAO Ying-jun^{1,2}

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004; 2. 广西大学广西有色金属及特色材料加工重点实验室, 广西南宁 530004; 3. 玉林师范学院物理科学与工程技术学院, 广西玉林 537000)

(1. College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. Ministry Key Laboratory for Non-ferrous Metal and Featured Materials, Nanning, Guangxi, 530004, China; 3. Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin, Guangxi, 537000, China)

摘要:采用晶体相场模型模拟小角度晶界结构和在外加应力作用下晶界、位错的演化过程,从位错的运动形式、体系自由能与应变关系等角度,讨论晶界位错运动和湮没过程。结果表明:在稳定的小角度晶界中,位错间距与位向差成反比。位错和晶界区域具有较高的能量密度;外加应力会导致一个位错组脱离晶界而分解成两个位错组,且有诱发晶界湮没的趋势;晶界湮没过程可以出现4个阶段或2个阶段,且存在敏感位向差角,位向差稍高于 5.85° 时晶界湮没过程呈4个阶段,位向差稍低于 5.85° 时晶界湮没过程呈2个阶段;位向差越小,晶界湮没过程越简单快捷。

关键词:晶体相场模型 位向差 位错 晶界

中图分类号: TG111.2 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2013)04-0316-05

Abstract: The phase field crystal model is employed to simulate the structure of low angle grain boundary and its dislocation evolution under an applied stress. The process of a dislocation motion and annihilation is discussed according to its movement and the relation between free energy and strain. The simulated results confirm that the dislocation spacing is inversely proportional to the misorientation angle. It shows that there is higher energy density in the region of dislocations and the grain boundaries than others. An applied stress can induce a double-array dislocation to separate from the grain boundary and split apart into two double-array dislocations and to trend to annihilate at grain boundary. The annihilation process contains four or two stages and also there is a sensitive angle. When misorientation angle is slightly higher than 5.85° the annihilation process contains four stages, while the annihilation process contains two stages when misorientation angle is slightly lower than 5.85° . The smaller the misorientation angle is, the faster the process of the grain boundary annihilation is.

dislocation to separate from the grain boundary and split apart into two double-array dislocations and to trend to annihilate at grain boundary. The annihilation process contains four or two stages and also there is a sensitive angle. When misorientation angle is slightly higher than 5.85° the annihilation process contains four stages, while the annihilation process contains two stages when misorientation angle is slightly lower than 5.85° . The smaller the misorientation angle is, the faster the process of the grain boundary annihilation is.

Key words: phase field crystal model, misorientation, dislocation, grain boundary

收稿日期: 2013-07-19

修回日期: 2013-09-30

作者简介: 卢成健(1964-), 男, 副教授, 主要从事材料学和物理学研究。

* 国家自然科学基金(51161003, 50661001, 50061001)、广西自然科学基金(2012GXNSFDA053001)、广西大学广西有色金属及特色材料加工重点实验室开放基金(GXKFJ12-01)、2012年广西大学本科实验技能与科技创新能力训练项目、广西“新世纪教改工程”项目(编号: 2011JGA096)资助。

** 通讯作者: 高英俊(1962-), 男, 教授, 博士研究生导师, 主要从事新材料设计与计算机模拟实验研究。E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn.

通常晶体物质由许多晶粒组成,晶界就是取向不同的晶粒之间的交界面。小角度晶界一般是指位向差小于 10° 的晶界,大角度晶界一般是指位向差大于 10° 的晶界^[1]。晶界是由一系列位错按特定方式排列而成。位错会引起它附近晶体点阵结构的弹性畸变,是一种内应力源^[1]。在稳定的环境条件下,晶界可以保持稳定的结构,而在外加应力作用下位错会发生运动以致在晶界处湮没^[2]。晶界的结构和迁移方式对材料的性能有重要的影响,晶界迁移在晶粒长大特别是冷加工金属材料的退火中有重要作用^[1]。晶界迁移过程涉及的原子运动过程快,而且是在非平衡条件下进行的,使得对晶界迁移无论是实验研究还是理论处理都比较困难。目前的实验条件还较难观察到晶界、亚晶界上位错的运动动力学过程,借助计算机模拟可以弥补实验的不足。采用晶体相场模型可以用来研究纳米尺寸下材料的结构,研究各种因素对位错分布和运动及其对晶界演化的影响^[3]。目前已有文献^[4]报道应用晶体相场模型模拟了外加应力、温度、位向差等因素对小角度对称倾转亚晶界湮没产生影响的过程。晶界的初始状态对其演化也有着不可忽略的影响。晶界区的宽度一般只有零点几纳米,在晶界区原子结构存在着失配,且失配越大,晶界能越高^[5]。因此,为了更准确地反映晶界位错的演化规律,需对影响晶界演化的因素进行严密细致的试验分析。

本文采用晶体相场模型模拟晶体原子结构,研究应力作用下,晶界位错的运动和湮没,以及位错的攀移和滑移过程的运动规律,讨论位错运动与应变的关系曲线,揭示位错的运动和自由能变化之间的内在联系。

1 模型与方法

1.1 相场模型

晶体相场是近几年提出的,它的优势在于能够描述原子的缺陷运动。晶体相场模型是一种基于密度泛函理论模型^[6],与传统相场^[7,8]不同,它可以描述原子在空间尺度和扩散时间尺度上的现象。晶体相场已用于研究位错和晶界的迁移^[2]、多晶凝固^[9]、纳米晶生长^[10]、结构相变^[11]等现象。

晶体相场模型采用具有周期性的局部时间平均原子密度 ρ 为序参量,用此序参量构造自由能函数如下^[6]:

$$F = \int \left[\frac{\rho}{2} \omega(\nabla^2) \rho + \frac{\rho^4}{4} \right] \cdot dV, \quad (1)$$

式中, $\omega(\nabla^2) = r + (1 + \nabla^2)^2$, r 是与系统温度有关的

参量, ∇^2 为 Laplace 算子, $\nabla^2 \rho$ 和 $\nabla^4 \rho$ 决定了系统的周期性。

对金属材料中的固相,其原子位置固定, ρ 的周期性与晶体点阵周期性一致, ρ 的最大值即表示实际空间中原子的位置,而液相的 ρ 是一个常数。

ρ 是一个保守场变量,根据 Cahn-Hilliard 方程可以导出其无量纲的动力学方程为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} + \zeta = \nabla^2 (\omega(\nabla^2) \rho + \rho^3) + \zeta, \quad (2)$$

式中, t 为时间变量, δ 为 Dirac 函数, ζ 为 Gauss 随机噪声项,具有零平均值。

对动力学方程(2)的二维解进行单模近似可以得到平衡时三角相的 ρ :

$$\rho = A \cdot [\cos(qx) \cos(qy/\sqrt{3}) - \cos(2qy/\sqrt{3})/2] + \rho_0, \quad (3)$$

式中, ρ_0 为平均密度, $A = \frac{4}{5}(\rho_0 + \frac{1}{3} \sqrt{-15r - 36\rho_0^2})$, $q = \sqrt{3}/2$ 。

由式(1)表示的自由能基态对应 3 种平衡相,即液相(liquid)、条状相(stripe)和三角相(triangular)。在二维系统中,通过单模近似可以获得平衡时各相的自由能密度,利用自由能公切线法确定相图^[6]如图 1 所示。本文模拟选取固相三角晶,取 $r = -0.25$, $\rho_0 = 0.285$ 。

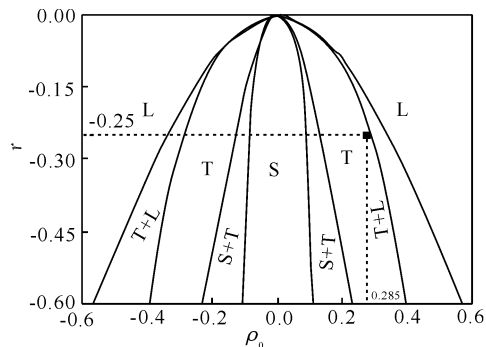


图 1 单模近似得到的二维相图

Fig. 1 Two dimensional phase diagram of phase field crystal

L, S, T 分别表示液相、条状相、三角相

L, S, T indicate liquid, strip, triangular phases, respectively

1.2 数值计算方法

对动力学方程(2)采用 Fourier 谱方法^[12]求解,其离散形式为:

$$\frac{\rho_{k,t+\Delta t} - \rho_{k,t}}{\Delta t} = -k^2 \{ [r + (1 - k^2)^2] \rho_{k,t+\Delta t} + (\rho_{k,t}^3) \}. \quad (4)$$

整理后得:

$$\rho_{\vec{k},t+\Delta t} = [\rho_{\vec{k},t} - k^2 \cdot (\rho)_{\vec{k},t}^3 \cdot \Delta t] / \{1 + k^2 \cdot [r + (1 - k^2)^2] \cdot \Delta t\}, \quad (5)$$

式中, $\rho_{\vec{k},t+\Delta t}$ 为 Fourier 空间 $t + \Delta t$ 时刻的原子密度, \vec{k} 为 Fourier 空间的波矢。

在具体的模拟中, 取空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$, 时间步长为 $\Delta t = 0.5$ 。总区域宽度 $N \times N = 256 \times 256$ 。初始条件按如下方式给出: 总区域内设置两个不同取向区域和两个较窄的液相区域, 取两个不同取向区域之间的液相初始宽度为 $d = 10$ 。使三角相的 ρ 取向在两边区域 $0 < x < \frac{1}{4}(N - 2d)$ 和 $\frac{1}{4}(3N + 2d) < x < N$ 范围内为 $\theta/2$, 在中间区域 $\frac{1}{4}(N + 2d) < x < \frac{3}{4}(N - 2d)$ 范围内为 $-\theta/2$, 其余区域为液相。液相区很快就呈现出固相原子并形成位错和晶界。考虑周期性边界条件, 两边区域实质上是一个区域。设置原子初始结构时, 使两晶粒交界边沿处原子排列严格水平对齐。

位错的分布和运动及晶界的演化与初始位向差有密切的关系, 可取不同的 θ 值模拟来研究位向差的影响。

在外加应力作用下, 变形过程中采用体积不变^[13]假设, 其边界条件仍为周期性边界条件, 则有

$$S = \Delta x \cdot \Delta y = \Delta x' \cdot \Delta y' \quad (6)$$

设无量纲的应变速率为 $\dot{\epsilon}$, 应变 $\epsilon = \dot{\epsilon} \cdot n \cdot \Delta t$ (其中 n 为时间步数, Δt 为时间步长)。在 x 方向上给体系一个拉应力, 则有

$$\Delta x' = (1 + \epsilon) \cdot \Delta x = \Delta x + n \cdot \dot{\epsilon} \cdot \Delta x \cdot \Delta t, \quad (7)$$

$$\Delta y' = \Delta y / (1 + \epsilon) = \Delta y / (1 + n \cdot \dot{\epsilon} \cdot \Delta t) \quad (8)$$

2 结果与分析

位错的分布和运动形态可取不同的位向差来模拟, 并且可以比较外加应力前后的形式变化, 分析位错的结构及其运动规律。

2.1 无外加应力作用的模拟

如果没有外加应力的作用, 且体系的温度和其它参数、条件保持一定, 晶界结构将保持稳定。在应变速率为 $\dot{\epsilon} = 0$ 的情况下, 位向差 θ 分别取 8° 、 6° 、 4° 、 2° 进行模拟, 得到相应的小角度晶界结构(图 2)。

理论上, 对于小角度晶界, 位错间距 D 与位错柏氏矢量 b 、位向差 θ 之间的关系^[1]为:

$$D = \frac{b}{2 \sin(\frac{\theta}{2})} \approx \frac{b}{\theta} \quad (9)$$

可见, 位错间距 D 与位向差 θ 成反比, 位向差 θ 越大, 位错间距越小。

由图 2a~d 可见, 每处位错都由两个多余原子面构成, 是位错组结构。对比图 2a~d 中的 4 个典型位向差的晶界结构图, 在晶界方向(竖直方向)总区域宽度范围, 出现有位错组分布的地方分别为 4 个、3 个、2 个、1 个。若以位向差 θ 为 2° 的晶界结构中对应的位错组间距为 d_0 , 则 4° 、 6° 、 8° 对应的位错组间距分别为 $d_0/2$ 、 $d_0/3$ 、 $d_0/4$, 从而验证了位错间距与位向差成反比。

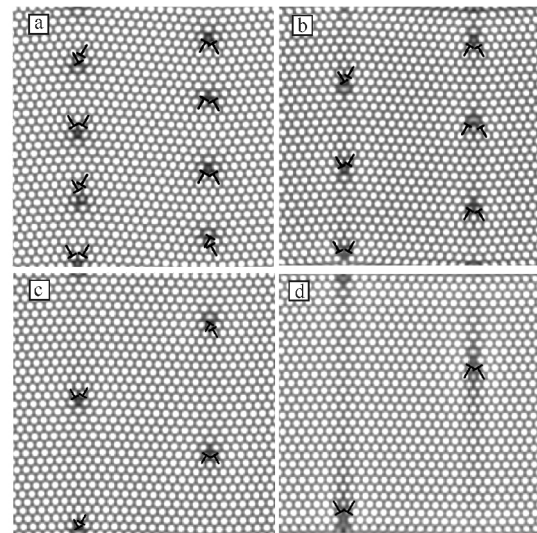


图 2 位向差 $\theta = 8^\circ$ (a), $\theta = 6^\circ$ (b), $\theta = 4^\circ$ (c), $\theta = 2^\circ$ (d) 时的晶界结构

Fig. 2 Grain boundary structure at several typical misorientation angles (θ): $\theta = 8^\circ$ (a), $\theta = 6^\circ$ (b), $\theta = 4^\circ$ (c), $\theta = 2^\circ$ (d)

2.2 在外加应力作用下的模拟

在外加应力作用下, 晶粒会发生变形, 并且会导致晶界湮没。取无量纲应变速率 $\dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6}$, 模拟得到位向差为 $\theta = 6.65^\circ$ 时的晶界湮没过程(图 3a~f), 在整个区域模拟计算, 得到体系演化的自由能-应变曲线(图 4a)。再选取位向差分别为 5.85° 、 5.84° 和 5° 进行模拟, 略去其晶界湮没过程示意图, 得到相应的体系自由能-应变曲线(图 4b~d)。

图 3 中的箭头表示其旁边的位错组在运动, 箭头方向表示位错组的运动方向。晶界湮没过程可以分为 4 个阶段: 第 1 阶段为位错组沿晶界的攀移, 晶界的位向差随应力的作用不断微弱变小(图 3a~b); 第 2 阶段为部分位错组脱离晶界滑移到晶粒内, 且一个位错组会分解成两个位错组, 这部分位错组在晶粒内进行攀移和滑移, 直至不同位置不同方向的位错组在晶粒内相遇消失, 位错组数量变少(图 3c~d); 第 3 阶段与第 1 阶段相似, 剩余的位错组沿晶界攀移(图

3e~g);第4阶段与第2阶段相似,但此时位错组全部脱离晶界,滑移到晶粒内(图3h),直至不同位置不同方向的位错组相遇而全部消失,位向差趋于零,晶界湮灭完成,成为一个晶粒(图3i)。

可以从能量的角度分析晶界的湮灭机制。从整个体系来看,体系自由能包含晶界的界面能和畸变能,位错密度越大,位错分布越不均匀,畸变程度越大,则体系的自由能越大;反之,体系自由能则越小。同时,外加应力产生的应变使体系畸变增大,导致体系自由能增大。上述晶界湮灭过程的4个阶段对应图4a曲线的4段,体系自由能出现2个极大值和2个极小值,虚线对应位错组脱离晶界,圆圈代表晶界湮灭完成,曲线上的一个实心点与晶界演化过程的一个图像对应,如图4a中曲线上的A点的应变与图3a的应变一致、B点的应变与图3b的应变一致、C点的应变与图3c的应变一致,其余的点依次类推。第1阶段,如图3a和图4a曲线上的A点,随着位错组的攀移塞积和应变累积,体系畸变使自由能逐渐增至极大,位错组的能量增加到可以脱离晶界的束缚,如图4a中第1条垂直虚线处。随后,位错组脱离晶界,进行到第2阶段,如图3b和图4a曲线上的B点处。随着应变的增大,其中部分位错组滑移到晶粒内,这个过程体系畸变程度很快变小,自由能迅速减小,直至晶粒内的位错组相遇消失,体系自由能很快变为第1个极小值,如图4a曲线上的D点。接着是第3阶段,随着应变的继续累积,剩余的位错组继续发生攀移,如图4a的E~G点,畸变逐渐增大,自由能逐渐增加至第2个极大值,如图4a中的第2条垂直虚线处。然后,剩余的位错组全部脱离晶界而分解且滑移到晶粒内,进行到第4阶段,如图3h和图4a曲线H点处,随着应变增大,位错组在晶粒内很快相遇而全部消失,自由能又变为极小值,如图4a曲线上的小圆圈I处,晶界湮灭完成。

对比图4a~d各条曲线可以看到,随着位向差的减小,晶界的湮灭变得更为简单和快捷。位向差在 6.65° 至 5.85° 范围,晶界的湮灭过程为4个阶段,晶界湮灭完成所需应变随着位向差的减小而减小。在 5.84° 至 5° 甚至更小的位向差,晶界湮灭过程演变为2个阶段,晶界湮灭完成所需应变也随着位向差的减小而减小。 $5.85^\circ \sim 5.84^\circ$ 是特殊的敏感角度,稍高时晶界湮灭为4个阶段,晶界湮灭较复杂且较慢;稍低时晶界湮灭为2个阶段,晶界湮灭较简单且较快捷。

对比图4a和b还可以发现,图4a曲线的两个峰-峰值相差较大,图4b曲线的两个峰-峰值相差较小。

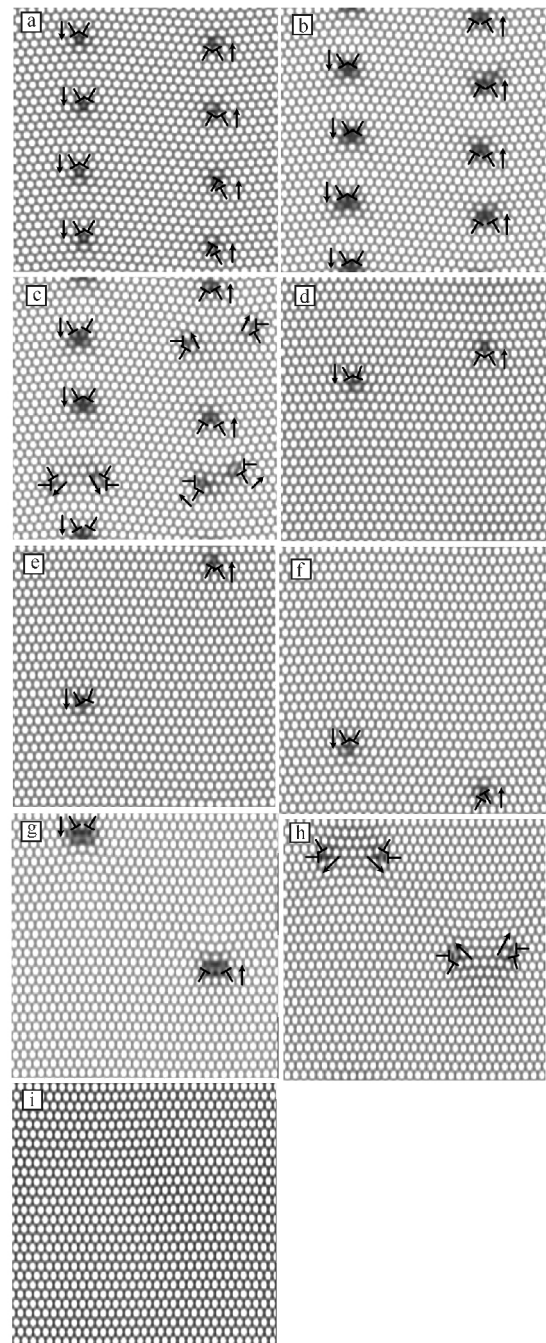


图3 位向差 $\theta = 6.65^\circ$ 时的晶界湮灭过程模拟

Fig. 3 Grain boundary annihilation simulated at $\theta = 6.65^\circ$

(a) strain $\epsilon = 0.0300$, (b) $\epsilon = 0.0810$, (c) $\epsilon = 0.0825$, (d) $\epsilon = 0.1035$, (e) $\epsilon = 0.1260$, (f) $\epsilon = 0.1380$, (g) $\epsilon = 0.1800$, (h) $\epsilon = 0.1815$, (i) $\epsilon = 0.1845$.

这是由于图4a对应的晶界湮灭过程中,在其第2阶段脱离晶界的位错组数量已占了总数的大部分(约3/4),在其第4阶段脱离晶界的位错组数量只占总数的小部分(约1/4),而位错和晶界区域具有更高的能量密度,或者说位错和晶界储存有更多的能量,第2阶段的大量位错组分离晶界直至消失释放出大量的能量,所以导致了第1个峰-峰值较大。第4阶段剩

余的少量位错组分离晶界直至消失对应着较少的能量释放,所以曲线的第2个峰-峰值较小。位向差为 5.85° 的晶界湮没过程的自由能-应变曲线如图4b,其晶界湮没过程也具有4个阶段,在第2阶段和第4阶段脱离晶界的位错组数量基本相等,所以曲线的两个峰-峰值也很接近。位向差为 5.84° 甚至更小值的晶界湮没过程的自由能-应变曲线如图4c~d,其晶界湮没过程只有2个阶段,第1阶段为位错组沿晶界的攀移,第2阶段全部位错组脱离晶界而分解且滑移到晶粒内部,在晶粒内相遇消失,很快完成湮没过程。

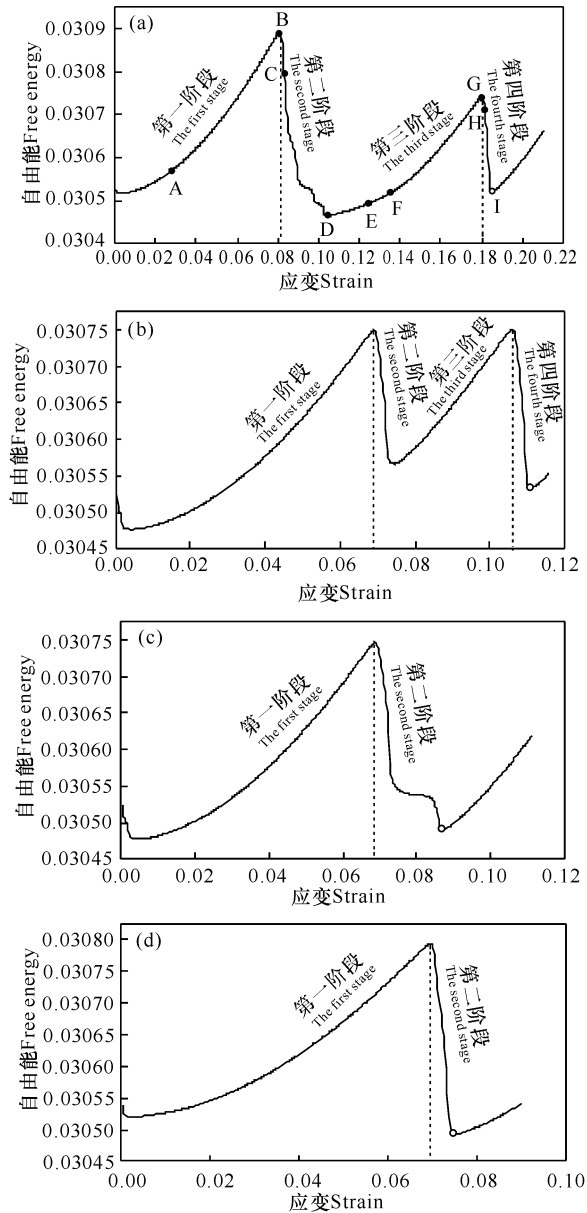


图4 各种位向差的自由能-应变曲线

Fig. 4 Free energy-strain curves at several misorientation angles

(a) $\theta = 6.65^\circ$, (b) $\theta = 5.85^\circ$, (c) $\theta = 5.84^\circ$, (d) $\theta = 5^\circ$.

3 结论

在稳定的小角度晶界中,位错间距与位向差成反比。在外加应力的作用下,位错组会脱离晶界而分解成一对位错组且向晶粒内滑移,不同的位错组在晶粒内相遇消失。随着初始位向差的减小,晶界湮没过程总体来说变得越来越快捷。位错运动形式与初始位向差有关,而且存在特殊敏感的位向差如 $5.85^\circ \sim 5.84^\circ$,当初始位向差大于 5.85° 时位错运动和晶界湮没分为4个阶段,湮没过程较慢较复杂;当初始位向差小于 5.84° 时位错运动和晶界湮没分为2个阶段,湮没过程较快较简单。

参考文献:

- [1] 徐恒均,刘国勋.材料科学基础[M].北京:北京工业出版社,2001:265-279.
- [2] Stefanovic P,Haataja M,Provatas N. Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials[J]. Physical Review E,2009,80(4):046107.
- [3] Berry J,Grant M,Elder K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions[J]. Physical Review E,2006,73(3):31609.
- [4] 杨涛,陈铮,董卫平.应力诱发双位错组亚晶界湮没的晶体相场模拟[J].金属学报,2011,47:1301-1306.
- [5] 徐瑞,荆天辅,徐庭栋.材料热力学与动力学[M].哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2003:164-177.
- [6] Elder K R,Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals[J]. Physical Review E,2004,70(5):51605.
- [7] Chen L Q. Phase-field models for microstructure evolution[J]. Annual Review of Materials Research,2002,32(1):113-140.
- [8] 高英俊,罗志荣,黄礼琳,等.变形合金的亚晶组织演化的相场模型[J].金属学报,2012,10(48):1215-1222.
- [9] Wu K A,Adland A,Karma A. Phase-field-crystal model for fcc ordering[J]. Phys Rev E,2010,81(6):061601.
- [10] 高英俊,王江帆,陈皓天.晶体相场法模拟纳米晶生长过程[J].广西物理,2012,33(3):20-22.
- [11] Greenwood M,Provatas N,Rottler J. Free energy functionals for efficient phase field crystal modeling of structural phase transformations[J]. Phys Rev Lett,2010,105(4):045702.
- [12] Chen L Q,Shen J. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations[J]. Computer Physics Communications,1998,108(2):147-158.
- [13] Hirouchi T,Takaki T,Tomita Y. Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation[J]. Computational Materials Science,2009,44(4):1192-1197.

(责任编辑:陈小玲)